磁性不純物近傍でのオーダーパラメータの空間変化

恒藤敏彦（阪大基工）
都築俊夫（京大理）

（6月20日受理）

磁性不純物は超電導に大きな影響を与えるので、[1]不純分のまわりでオーダーパラメータが空間的にどのように変化しているかと云うことは面白い問題だと思う。実際、不純物ポテンシャルの range は非常に短いが、コヒーレンスの長さは非常に大きいので、不純物による散乱の影響は不純物からかなり離れた位置にまで尾を引いていると期待される。しかしこの表現は正確でない。物理的に考えて明らかなように、もしポテンシャルが spin-flip effect を持たないと、不純物の効果はやはり short range であり、鋭いフエルミ面の存在による波数 P_F 程度の振動的変化をオーダーパラメータに与えるにすぎない。

この点については Fetter が調べている。[2]我々にとつて興味のあるのは spin flip scattering をひきおこす磁性不純物が存在する場合である。spin flip は超電導に destructive effect を与えるので、オーダーパラメーターの変化には long range になるであろう。以下では、まず磁性不純物が唯一つ存在する場合について調べる。転移温度近傍に限る。次いで、低密度の極限で、転移温度への影響を報告する。

I Single Paramagnetic Impurity.

コヒーレンスの長さに比して potential $\hat{V}(\underset{\sim}{r})$ の range は非常に短いので、デルタ関数型に取る。不純物は原点にあるとして

$$\hat{V}(r) = \frac{2\pi}{m}\{ b_0 + a_0 \underset{\sim}{S}\cdot\underset{\sim}{\hat{\sigma}} \}\,\delta(\underset{\sim}{r}) \tag{1}$$

b_0, a_0 は potential の nonmagnetic part 及び spin dependent part に対応する scattering length である。[3] $\hat{\underset{\sim}{S}}$ は不純物スピン $\hbar=1$。転移温度

近くに限るとオーダーパラメータ $\Delta_{\alpha\beta}(\underset{\sim}{r})$ は小さいので、一次近似で $\Delta_{\alpha\beta}(\underset{\sim}{r})$ の従う方程式は

$$\Delta_{\alpha\beta}(\underset{\sim}{r}) = g T \sum_{\omega} \int d^3 \ell \, G_{n\alpha\lambda}(\underset{\sim}{r} \, \underset{\sim}{\ell} \, \omega) \, \Delta_{\lambda\gamma}(\underset{\sim}{\ell}) \, G_{n\beta\gamma}(\underset{\sim}{r}, \underset{\sim}{\ell} \, -\omega) \tag{2}$$

で与えられる。絶対値も決めようとすれば、非線型項を含める必要があるが、我々にとつて空間的変化のみに興味がある。G_n は不純物場内での正常電子のグリーン関数で、

$$G_{n\alpha\beta}(\underset{\sim}{r}, \underset{\sim}{r}' \, \omega) = G_0(\underset{\sim}{r}, \underset{\sim}{r}' \, \omega) \, \delta_{\alpha\beta} + G_0(\underset{\sim}{r} \, \upsilon \, \omega) \left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(\omega) \hat{V}} \right)_{\alpha\beta} G_0(0 \, \underset{\sim}{r}' \, \omega)$$

で正確に与えられる。

ここで Kondo 効果は考えていない。$G_0(\underset{\sim}{r} \, \underset{\sim}{r}' \, \omega)$ は自由電子のグリーン関数、$\rho_0(\omega) = -i\pi N(0) \, \mathrm{sign}\, \omega$. $N(0)$ はフエルミ面での状態密度である。

$$\Delta_{\alpha\beta}(\underset{\sim}{r}) = \Delta(\underset{\sim}{r}) \, g_{\alpha\beta}, \qquad g_{\alpha\beta} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

を用いて $\Delta(r)$ に対する方程式に書くと

$$\begin{aligned} \Delta(r) = {} & g T \sum_{\omega} \int d^3 \ell \, G_0(|r-\ell| \omega) \, G_0(|r-\ell| -\omega) \, \Delta(\ell) \\ & + g T \sum_{\omega} \left[\left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(\omega) \hat{V}} \right)_{11} + \left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(\omega) \hat{V}} \right)_{22} \right] \\ & \times \int d^3 \ell \, G_0(r\omega) \, G_0(|r-\ell| -\omega) \, \Delta(\ell) \\ & + g T \sum_{\omega} \left[\left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(\omega) \hat{V}} \right)_{11} \left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(-\omega) \hat{V}} \right)_{22} - \left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(\omega) \hat{V}} \right)_{12} \left(\frac{\hat{V}}{1-\rho_0(-\omega) \hat{V}} \right)_{21} \right] \\ & \times \int d^3 \ell \, G_0(r\omega) \, G_0(r, -\omega) \, G_0(\ell\omega) \, G_0(\ell -\omega) \, \Delta(\ell) \end{aligned} \tag{4}$$

始めに述べたように、(4)の右辺は、a_0に依存した longe range な非振動型の積分 kernel を与えることを示そう。そのため

$$G_0(r\omega) = -\frac{m}{2\pi r} \exp\left[i\rho_0 r \, \mathrm{sign}\, \omega - \frac{|\omega|}{v_0} r \right] \qquad p_F r \gg 1 \tag{5}$$

を用いて右辺の計算をする。

$$I_1 = \int d^3 \ell\, G_0(r\omega)\, G_0(r-\omega)\, G_0(\ell\omega)\, G_0(\ell-\omega)\, \Delta(\ell)$$

$$I_2 = \int d^3 \ell\, G_0(r\omega)\, G_0(\ell\omega)\, G_0(|r-\ell|-\omega)\, \Delta(\ell)$$

とかくと、ω_0/ε_F を無視する近似で

$$I_2 = -\frac{1}{2\rho_0(\omega)} I_1 \tag{6}$$

を示すことが出来る。波数 p_F の振動効果は ω_0/ε_F のオーダーの寄与しかしない。ここで ε_F ω_0 はフエルミエネルギーとデバイ振動数である。(6)を用いて(5)の右辺を計算すれば、nonmagnetic part は完全に打消し合つて

$$\Delta(r) = gT\sum_\omega \int d^3\ell\, K_0(|r-\ell|\,\omega)\, \Delta(\ell)$$

$$-2\left(\frac{2\pi}{m}\right)^2 a^2 gT \sum_\omega K_0(r\omega) \int d^3\ell\, K_0(\ell\omega)\, \Delta(\ell) \tag{7}$$

をうる。

$$K_0(r\omega) \equiv G_0(r\omega)\, G_0(r-\omega) = \left(\frac{m}{2\pi r}\right)^2 e^{-\frac{2|\omega|}{v_0} r} \tag{8}$$

はBCS kernel。 a は(1)の a_0 を renormalize した scattering length ただし簡単のためスピンの大きさを含めた。

$$a = \frac{\sqrt{S(S+1)}}{|D|}\, a_0 \tag{9}$$

(7)の解を求める。

$$\Delta(r) = \Delta_0\,[\,1+F(r)\,], \qquad \Delta_0 = \Delta(\infty) \tag{10}$$

とかく。フーリエ空間で考える。

$$\varepsilon(q)\, F(q) = -\frac{8a^2 p_0}{mT}\, gN(0) \sum_{\omega>0} \frac{2\pi T}{v \cdot q} \tan^{-1}\frac{v_0 q}{2\omega}\, G(\omega) \tag{11}$$

$$\epsilon(q) = -gN(0)\{\ell n\frac{T_{c0}}{T} - \frac{4\pi T}{v_0 q}\sum_{\omega>0}(\frac{v_0 q}{2\omega} - \tan^{-1}\frac{v_0 q}{2\omega})\} \tag{12}$$

$$G(\omega) = \frac{\pi T}{\omega} + \sum_q \frac{2\pi T}{v_0 q}\tan^{-1}\frac{v_0 q}{2\omega}F(q) \tag{13}$$

$\epsilon(q)$ は或る値 q^0 でのコヒーレンスの長さを $\xi_0(T)$ とかくと $q_0 \sim \xi_0^{-1}(T)$

$$\frac{v_0 q_0}{2\pi T} \sim \frac{\xi_0(T)}{\xi_0(0)} \ll 1$$

だから、(12) から

$$x_0^2 \equiv (\frac{v_0 q_0}{2\pi T})^2 = \frac{12}{7\zeta(3)}\ell n\frac{T_{c0}}{T} \tag{14}$$

この q_0 に対して (11) の右辺は零でなくてはならないので、附加条件

$$\sum_{\ell=0} \tan^{-1}\frac{x_0}{2\ell+1}\cdot G(\omega) = 0 \tag{15}$$

がつく。(11)、(13) は q 積分で大きな q から発散が現われる。適当な値 q_c でカットすることにする。結果から分るように $x_c = v_0 q_c/2\pi T \gg 1$ 考慮して、(11), (13) の q- 依存性を調べると

$$F(q) = -\frac{c}{x}\tan^{-1}x, \quad x = \frac{v_0 q}{2\pi T} \tag{16}$$

$$C = \frac{24\pi^2}{7\zeta(3)}\cdot\frac{x_c}{\ell n x_c}\cdot\frac{a^2 p_0}{mT} \tag{17}$$

が良い近似解であることが分る。ここで

$$x_c = \sqrt{\frac{7\zeta(3)}{24\pi^3}}(\frac{q_F}{T})\cdot\frac{1}{a\rho_0} \tag{18}$$

でカット x_c は scattering length と結びつけられる。r- 空間にもどすと

$$F(r) = -\pi^2\frac{x_c}{\ell n x_c}(\frac{a}{r})^2 e^{-\frac{2\pi T}{v_0}r} \tag{19}$$

このように、不純物によるオーダーパラメータの変化は scattering length よりずっと long range になる。この結果は問題の非局所性による

ものであることを注意しておく。

ところで (19) は不純物の近くで発散する。しかし実際には不純物の近く近傍ではオーダーパラメータは零になつているであろうから $\Delta(r)=0$ の点 r_c でカツトしてそれより内部では $\Delta=0$ と考える。この r_c は

$$r_c\, e^{\frac{\pi T}{V_0}} = \pi \frac{x_c}{\ell n\, x_c}\, a \tag{20}$$

で与えられる。

II 転移温度への影響

低密度の極限で、オーダーパラメータの空間的変化が転移温度にどのような影響をもつかを調べよう。randomに分布しているとして、それらの位置を $R_1 \cdots\cdots R_N$ とする。不純物と不純物の間で Δ が一定値になるその値を Δ_1 とかくと

$$\Delta(r) = \Delta\,(r : R_1 \cdots R_N) = \Delta_i\,[\,1 + F(r\,; R_1 \cdots R_N)\,] \tag{21}$$

体積平均を $\bar{\Delta}$ とかくと

$$\bar{\Delta} = \frac{1}{v}\int d^3r\,\Delta(r) = \Delta_i\,[\,1+\bar{F}\,(R_1 \cdots R_N)\,]$$

$$\therefore\ \Delta\,(r\ ; R_1 \cdots R_N) = \bar{\Delta}\,\frac{1+F\,(v : R_1 \cdots R_N)}{1+\bar{F}} \tag{22}$$

一方 gap方程式の核を $K_{\alpha\beta}(r, \ell : R_1 \cdots R_N)$ とかくと

$$K_{\alpha\beta}(r\ell : R_1 \cdots R_N) = K_0(\,|r-\ell|\,)\, g_{\alpha\beta} + K_{1\alpha\beta}(r\ell : R_1 \cdots R_N)\, g_{\alpha\beta} \tag{22}$$

従つてある不純物の配置の仕方を決めると

$$\frac{1}{g} = \frac{1}{v}\int d^3r\, d^3\ell\, K(r\ell : R_1 \cdots R_N)\,\frac{1+F(\ell : R_1 \cdots R_N)}{1+\bar{F}} \tag{23}$$

当然のことながら Δ_i 又は $\bar{\Delta}$ には移存しない。

$|\bar{F}| \ll 1$ だから

$$\frac{1}{g}=\frac{1}{V}\int d^3r d^3\ell K(r\ell:R_1\cdots R_N)\{1+F(\ell:R_1\cdots R_N)-\overline{F}\}$$

(22) を用いて

$$\frac{1}{g}=\frac{1}{V}\int d^3r d^3\ell\{K_0(|r-\ell|)+K_1(r\ell:R_1\cdots\cdots R_N)\}$$

$$+\frac{1}{V}\int d^3r d^3\ell K_1(r\ell:R_1\cdots R_N)\{F(\ell:R_1\cdots R_N)-\overline{F}(R_1\cdots R_N)\} \quad (24)$$

不純物の位置について平均を取つてT_cを決めよう。すぐ分るように (24) の右辺の第一項はBCS 項とAbrikosov-Gor' kov 項を与える。オーダーパラメーターの空間的変化がAG への補正になる。低密度極限では、$F(r:R_1\cdots R_N)$は夫々の不純物でのまわりでの変化の和と近似してよいであろう。

$$F(r:R_1\cdots R_N)=\sum_{i=1} F(r-R_i) \quad (25)$$

この場合、積分核も同様に和ととつてよいことが証明される。

$$K_1(r\ell:R_1\cdots R_N)=\sum_{i=1}^{N} K_1(r\ell:R_i) \quad (26)$$

$K_1(r_1\ell:R_i)$は single impurity の場合に与えられている。異つた不純物は独立であるとして

$$\frac{1}{V}\int d^3r d^3\ell<K_1(r\ell:R_1\cdots R_N)\{F(\ell:R_1\cdots R_N)-\overline{F}(R_1\cdots\cdots R_N)\}>_{av}$$

$$=\frac{1}{V}\sum_i\int d^3r d^3\ell\{<K_1(r\ell;R_i)F(\ell;R_i)>_{av}-<K_1(r\ell;R_i)>_{av}\overline{F}\}$$

$$+\frac{1}{V}\sum_{i\neq j}\int d^3r d^3\ell\{<K_1(r\ell:R_i)>_{av}<F(\ell;R_j)>_{av}-<K_1(r\ell;R_i)>_{av}\overline{F}\}$$

$<F>_{av}=\overline{F}$ に注意すれば、不純物密度$n_i=N/v$の２乗に比例する第二行は完全に打ち消し合うことが分る。第一行の積分を実行すれば

$$\ln\frac{T_\infty}{T_c}=\frac{1}{2}\cdot\frac{\epsilon_F}{T_c}(ap_0)^2\frac{n_i}{n}$$

$$-\frac{ni}{N(0)}m^2a^4\frac{x_c}{\ell n\, x_c}T\sum_{\ell=0}^{\infty}\int d^3r\,\frac{e^{-\frac{2\pi T}{v_0}(2\ell+1)r}}{r^2}\int d^3s\,\frac{1}{s^4}e^{-\frac{2\pi T}{v_0}(2\ell+2)s}$$

S 積分の下限は発散するのが、前節で述べたように r_c でカツトする。$2\pi Tr_c/v_0 \ll 1$ に注意して

$$\ell n\frac{T_{co}}{T_c}=\frac{1}{2}\cdot\frac{\epsilon_F}{T_c}(ap_0)^2\frac{ni}{n}\left[1-\frac{32\pi}{3}\cdot\frac{x_c}{\ell n\, x_c}ap_0\cdot\frac{a}{r_c}\cdot\frac{T_c}{\epsilon_F}\right] \tag{27}$$

となる。おなじみのAGの記号で書こうとすれば

$$\frac{1}{\tau_3}=\frac{8}{3\pi}\epsilon_F\cdot(ap_0)^2\frac{ni}{n} \tag{28}$$

を用いるとよい。(27) の右辺第一項はAGと全く同じであることはすぐ分るであろう。オーダーパラメータの空間的変化は T_c を少し上昇させる。代表的な場合で、AG への補正は 1 %程度であろう。しかし T_c からこの補正を実験的にチエツクすることは困難であろう。Kondo resonace による補正と重なり合つてしまうからである。

参考文献

1) Abrikosov, Gor′kov : Soviet Phys. JETP 12 (1961) 1243

2) Fetter : Phys. Rev. 140 (1965) A1921

3) Landau, Lifshitz : Quantum Mechanics p. 466.